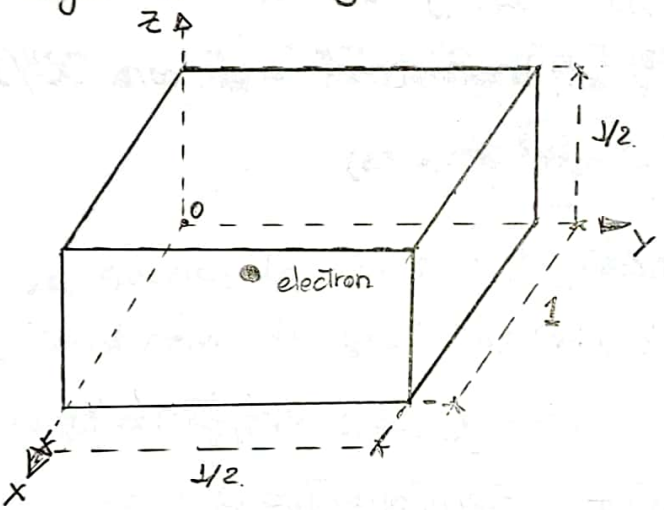
Universidad Andrés Bello

solemne 3 - 2015

P.2| Considere la region $\Omega = [0,1] \times [0,1/2] \times [0,1/2]$ en $\mathbb{R}^3$, y suponga un electron dentro de tal caja. Sea $\psi = \psi(x,y,z)$ la función de onda de tal electron, de manera que si el electron se encuentra en un estado descrito por la función de onda ψ, entonces se tiene la ecuación de schrodinger $-\hbar^2/2m \, \Delta\psi = E\psi$, donde E es la energía del electron, m su masa, y $\hbar$ es la constante de Planck.
Si ψ es igual a cero en todas las caras del paralelepípedo y se escogen unidades de manera que $\hbar^2 = 2m$, describa todos los estados del electron cuya energía es menor o igual a $15\pi^2$.

solución:

Tenemos una caja de las siguientes dimensiones:



Tenemos 6 condiciones de borde:

1) $\psi(0,y,z) = 0$
2) $\psi(1,y,z) = 0$
3) $\psi(x,0,z) = 0$
4) $\psi(x,1/2,z) = 0$
5) $\psi(x,y,0) = 0$
6) $\psi(x,y,1/2) = 0$

se tiene la ecuación de Schrodinper $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi = E\psi$, pero como se estan escogiendo unidades adecuadas para hacer $\hbar^2 = 2m$, la ecuación que se debe resolver es: $-\Delta\psi = E\psi$.
Debido a la geometría de la región estudiada, se usaran coordenadas cartesianas. En este caso, la ecuación queda expresada como:

$$-\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi(x,y,z) = E\,\psi(x,y,z) \quad \ldots (1)$$

utilizando el método de separacción de variables, se puede afirmar que.

$$\psi(x,y,z) = X(x)\,Y(y)\,Z(z)$$

Escaneado con CamScanner

2|

Reemplazamos en la ecuación (1):

$$-\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}[XYZ_1]+\frac{\partial^2}{\partial y^2}[XYZ_1]+\frac{\partial^2}{\partial z^2}[XYZ_1]\right\}=E[XYZ_1]$$

$$-\left\{YZ_1\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}+XZ_1\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}+XY\frac{\partial^2 Z_1}{\partial z^2}\right\}=E[XYZ_1]$$

simplificando un poco la notación:

$$-[YZ_1X''+XZ_1Y''+XYZ_1'']=E[XYZ_1]$$

Dividimos entre: XYZ_1, asumiendo $XYZ_1\neq 0$

$$-\left[\frac{YZ_1X''}{XYZ_1}+\frac{XZ_1Y''}{XYZ_1}+\frac{XYZ_1''}{XYZ_1}\right]=E\frac{XYZ_1}{XYZ_1}$$

$$-\left[\frac{X''}{X}+\frac{Y''}{Y}+\frac{Z_1''}{Z_1}\right]=E \quad \ldots(2).$$

Ahora, escogemos una constante de separación $-\alpha^2$ para X''/X:

$$\frac{X''}{X}=-\alpha^2 \quad \ldots(3)$$

la solución para dicha ecuación es:

$$X_\alpha(x)=A_\alpha\cos(\alpha x)+B_\alpha\operatorname{sen}(\alpha x).$$

Aplicamos la condición de frontera.(1): $\psi(0,y,z)=0$.

$$\Rightarrow X_\alpha(0)=A_\alpha\cos[\alpha(0)]+B_\alpha\operatorname{sen}[\alpha(0)]=0.$$

$$A_\alpha[1]+B_\alpha[0]=0.$$

$$\Rightarrow \boxed{A_\alpha=0}$$

Entonces, X_α va quedando como: $X_\alpha(x)=B_\alpha\operatorname{sen}(\alpha x)$.

Aplicando la condición de frontera.(2): $\psi(1,y,z)=0$.

$$\Rightarrow X_\alpha(1)=B_\alpha\operatorname{sen}[\alpha(1)]=0$$

$$\operatorname{sen}[\alpha(1)]=0 \text{ ; asumiendo } B_\alpha\neq 0.$$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha_n=n\pi}$$ Valores admisibles de α_n.

Escaneado con CamScanner

Universidad Andrés Bello

Entonces X_α queda como: $X_{\alpha_n}(x) = B_{\alpha_n} \operatorname{sen}(\alpha_n x)$.

$$\boxed{X_n(x) = B_n \operatorname{sen}[n\pi x]}$$

Ahora, tomamos la constante de separación $-\beta^2$ para Y''/Y:

$$\frac{Y''}{Y} = -\beta^2 \quad \dots (4)$$

la solución para esta ecuación es:

$$Y_\beta(y) = A_\beta \cos(\beta y) + B_\beta \operatorname{sen}(\beta y)$$

Aplicando la condición de frontera (3): $\psi(x,0,z) = 0$.

$$\Rightarrow Y_\beta(0) = A_\beta \cos[\beta(0)] + B_\beta \operatorname{sen}[\beta(0)] = 0.$$

$$A_\beta [1] + B_\beta [0] = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{A_\beta = 0}$$

Entonces, Y_β va quedando como: $Y_\beta(y) = B_\beta \operatorname{sen}(\beta y)$

Aplicamos la condición de frontera (4): $\psi(x, y_2, z) = 0$.

$$\Rightarrow Y_\beta(+l/2) = A_\beta \operatorname{sen}[\beta(+l/2)] = 0$$

$$\operatorname{sen}[\beta(l/2)] = 0, \text{ asumiendo } B_\beta \neq 0.$$

$$\Rightarrow \beta(l/2) = m\pi$$

$$\Rightarrow \boxed{\beta_m = 2m\pi} \quad \text{Valores admisibles de } \beta.$$

Entonces, Y_β queda como: $Y_{\beta_m}(y) = B_{\beta_m} \operatorname{sen}(\beta_m y)$

$$\boxed{Y_m(y) = B_m \operatorname{sen}[2m\pi y]}$$

Escaneado con CamScanner

4]

Ahora, escojemos una constante de separación $-\mu^2$ para Z''/Z:

$$\frac{Z''}{Z} = -\mu^2 \quad ..(5)$$

la solución para esta ecuación es:

$$Z_\mu(z) = A_\mu \cos(\mu z) + B_\mu \operatorname{sen}(\mu z)$$

Aplicando, la condición de frontera. (5): $\psi(x,y,0) = 0$.

$$\Rightarrow Z_\mu(0) = A_\mu \cos[\mu(0)] + B_\mu \operatorname{sen}[\mu(0)] = 0.$$

$$A_\mu [1] + B_\mu [0] = 0.$$

$$\Rightarrow \boxed{A_\mu = 0}$$

Entonces, $Z_\mu(z)$ va quedando como: $Z_\mu(z) = B_\mu \operatorname{sen}(\mu z)$.

Aplicando, la condición de frontera (6): $\psi(x,y,1/2) = 0$.

$$\Rightarrow Z_\mu(1/2) = B_\mu \operatorname{sen}[\mu(1/2)] = 0$$

$$\operatorname{sen}[\mu(1/2)] = 0, \text{ asumiendo } B_\mu \neq 0$$

$$\rightarrow \mu(1/2) = k\pi$$

$$\Rightarrow \boxed{\mu_k = 2k\pi}$$

Entonces, $Z_\mu(z)$ queda como: $Z_{\mu_k}(z) = B_{\mu_k} \operatorname{sen}(\mu_k z)$.

$$\boxed{Z_k(z) = B_k \operatorname{sen}[2k\pi z]}$$

Ahora, regresamos a la ecuación (2) y reemplazamos (3), (4), (5) en ella:

$$-[-\alpha^2 - \beta^2 - \mu^2] = E$$

$$\alpha^2 + \beta^2 + \mu^2 = E$$

reemplazemos las expresiones halladas para α, β y μ:

$$(n\pi)^2 + (2m\pi)^2 + (2k\pi)^2 = E$$

$$\pi^2[n^2 + (2m)^2 + (2k)^2] = E$$

Ahora, nos piden hallar los estados menores o iguales a $15\pi^2$. Para ello

Escaneado con CamScanner

Universidad Andrés Bello

debemos hallar valores de n, m y K

n	m	K	$n^2+4m^2+4K^2$ ≤ 15
1	0	0	$1+0+0=1$
0	1	0	$0+4+0=4$
0	0	1	$0+0+4=4$
0	1	1	$0+4+4=8$
1	0	1	$1+0+4=5$
1	1	0	$1+4+0=5$
2	1	0	$4+4+0=8$
2	0	1	$4+0+4=8$
2	1	1	$4+4+4=12$
2	0	0	$4+0+0=4$
3	0	0	$9+0+0=9$
1	1	1	$1+4+4=9$

$\Rightarrow$ nota|:

n, m y K, deberían tomar valores a partir de 1 porque $n=0$ ó $m=0$ ó $K=0$, anulan la función de onda (ψ). Lo que implicaría que el electron no se encuentra dentro de la región de estudio.
En ese caso los estados serían únicamente:
(2 1 1) (1 1 1).

Escaneado con CamScanner

6]

Ahora, debemos calcular el valor de B_n, B_m, B_k: Para ello utilizaremos argumentos físicos y podemos expresar lo siguiente:

$$[B_n]^2 \int_0^1 \operatorname{sen}^2[n\pi x]\,dx = 1 \Rightarrow B_n = \sqrt{2}$$

$$[B_m]^2 \int_0^{1/2} \operatorname{sen}^2[2m\pi y]\,dy = 1 \Rightarrow B_m = 2$$

$$[B_k]^2 \int_0^{1/2} \operatorname{sen}^2[2k\pi z]\,dz = 1 \Rightarrow B_k = 2$$

Podemos escribir la solución general como:

$$\psi(x,y,z) = \sqrt{2}\,\operatorname{sen}[n\pi x]\,2\operatorname{sen}[2m\pi y]\,2\operatorname{sen}[2k\pi z]$$

$$\boxed{\psi(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[n\pi x]\operatorname{sen}[2m\pi y]\operatorname{sen}[2k\pi z]}$$

con: $E = \pi^2[n^2 + (2m)^2 + (2k)^2]$; $n,m,k : 1,2,3.$

los estados solicitados, menores a $15\pi^2$ son:

$\psi_1(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(1)\pi x]\operatorname{sen}[2(0)\pi y]\operatorname{sen}[2(0)\pi z]$

$\psi_2(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(0)\pi x]\operatorname{sen}[2(1)\pi y]\operatorname{sen}[2(0)\pi z]$

$\psi_3(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(0)\pi x]\operatorname{sen}[2(0)\pi y]\operatorname{sen}[2(1)\pi z]$

$\psi_4(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(0)\pi x]\operatorname{sen}[2(1)\pi y]\operatorname{sen}[2(1)\pi z]$

$\psi_5(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(1)\pi x]\operatorname{sen}[2(0)\pi y]\operatorname{sen}[2(1)\pi z]$

$\psi_6(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(1)\pi x]\operatorname{sen}[2(1)\pi y]\operatorname{sen}[2(0)\pi z]$

$\psi_7(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(2)\pi x]\operatorname{sen}[2(1)\pi y]\operatorname{sen}[2(0)\pi z]$

$\psi_8(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(2)\pi x]\operatorname{sen}[2(0)\pi y]\operatorname{sen}[2(1)\pi z]$

$\psi_9(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(2)\pi x]\operatorname{sen}[2(1)\pi y]\operatorname{sen}[2(1)\pi z]$

$\psi_{10}(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(2)\pi x]\operatorname{sen}[2(0)\pi y]\operatorname{sen}[2(0)\pi z]$

$\psi_{11}(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(3)\pi x]\operatorname{sen}[2(0)\pi y]\operatorname{sen}[2(0)\pi z]$

$\psi_{12}(x,y,z) = 4\sqrt{2}\operatorname{sen}[(1)\pi x]\operatorname{sen}[2(1)\pi y]\operatorname{sen}[2(1)\pi z]$

Escaneado con CamScanner